

Soluzione preliminare del problema 8

Problema 8) Semplice teoria della collisione

a) L'equazione di Arrhenius $K = A e^{-E_a/RT}$ può essere riscritta in forma logaritmica e diventa $\ln K = -E_a/R * 1/T + \ln A$; quest'ultima non è altro che l'equazione di una retta.

Invece di disegnare la retta, si possono calcolare vari valori di E_a dalla seguente equazione:

$$\ln K_2/K_1 = E_a/R * (1/T_1 - 1/T_2) \quad \text{e poi farne un valore mediato.}$$

A me viene all'incirca un valore di 8900 J/mol.

b) Notiamo che questa assomiglia moltissimo all'equazione di Arrhenius, infatti il termine prima di quello esponenziale si può considerare pressoché costante al variare della temperatura (perché la T è sotto radice), e quindi questo termine diventa A.

σ rappresenta la sezione d'urto, ossia l'area in cui si verifica l'urto fra le molecole (che è un fatto necessario, ma non sufficiente affinché avvenga la reazione). Considerando due molecole diverse, la sezione d'urto vale πd^2 , con $d = d_A + d_B$.

La K, e quindi la velocità di reazione esprimono il numero di urti nell'unità di volume;

$V = \sigma * L$ con L che rappresenta la lunghezza percorsa nell'unità di tempo, ossia la velocità media delle molecole, che è rappresentata dall'espressione sotto radice, che deriva dalla distribuzione delle velocità di Maxwell.

Perché avvenga la reazione, non solo si deve verificare l'urto, ma tale urto deve essere pure efficace, ossia la molecola deve possedere un'energia cinetica sufficiente a superare l'energia di attivazione; il numero di urti efficaci è espresso tramite il fattore della distribuzione di Boltzmann $e^{-E_a/RT}$.

c) Bisogna stare molto attenti per quanto riguarda le unità di misura.

Innanzitutto l' E_a va posta uguale al valore determinato in a), ossia $E_a = 8900 \text{ J/mol}$; $T = 400 \text{ K}$; poi $1/\mu = 1/M_A + 1/M_B$, con M_A e M_B masse molecolari espresse in Kg delle due specie

(ossia $1.66 * 10^{-27}$ per la prima e $4.65 * 10^{-26}$ per l'altra). Come costante cinetica utilizziamo quella a 400K stando ancora attenti all'unità di misura, infatti la devo portare in m^3 .

$$K = 2.83 / 10^{12} * 10^{-6} = 2.83 * 10^{-18} \text{ m}^3 \text{ molecola}^{-1} \text{ s}^{-1} \quad \text{così facendo ottengo } \sigma = 1.16 * 10^{-20} \text{ m}^2.$$

Questo valore è minore del valore $4 * 10^{-19} \text{ m}^2$.

Soluzione proposta da

Luca Zucchini

medaglia di bronzo alle olimpiadi IChO 2008